

II. ÍNDICE DE CONTENIDOS

I.	AGRADECIMIENTOS.....	3
II.	ÍNDICE DE CONTENIDOS.....	5
III.	ÍNDICE DE FIGURAS.....	6
IV.	ÍNDICE DE GRÁFICAS.....	7
V.	RESUMEN.....	8
VI.	ABSTRACT.....	9
1.-	INTRODUCCIÓN.....	10
2.-	HIPÓTESIS DE TRABAJO Y OBJETIVOS.....	16
2.1.-	Hipótesis.....	16
2.2.-	Objetivos.....	16
2.2.1.-	Objetivo General.....	16
2.2.2.-	Objetivos Específicos.....	16
3.-	MATERIALES Y MÉTODOS.....	17
3.1.-	El Sistema.....	17
3.2.-	Dinámica Molecular.....	19
3.3.-	Aplicación de DM.....	22
3.4.-	Cálculo de energía libre.....	23
3.5.-	ABF (AdaptiveBiasingForce).....	23
3.6.-	Aplicación del método ABF.....	25
3.7.-	Cálculos de RDF.....	29
3.8.-	Cálculos de Densidad Iónica.....	29
3.9.-	Visual Molecular Dynamics (VMD).....	30
4.-	RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	31
4.1.-	Trayectorias de Dinámica Molecular.....	31
4.2.-	Análisis del Perfil de Energía Libre obtenido con ABF, enfoque 1.....	33
4.3.-	Análisis del Perfil de Energía Libre obtenido con ABF, enfoque 2.....	36
4.4.-	Análisis estructural de las trayectorias de ABF.....	38
4.5.-	Análisis de las trayectorias de DM.....	44
4.5.1.-	Análisis de Densidad Iónica.....	44

4.5.2.- Análisis de RDF.....	45
5.- CONCLUSIONES.....	46
6.- REFERENCIAS.....	48
7.- ANEXOS.....	51
7.1.- Presentación a Congresos.....	51
7.2.- Material Suplementario.....	52

III. ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1: Sitios de unión en el filtro de selectividad.....	11
Figura 1.2: Disposición de iones de K^+ y moléculas de agua en el filtro de selectividad.....	12
Figura 1.3: Clasificación de los canales de potasio.....	13
Figura 1.4: Árbol filogenético de la familia de los canales de potasio KCNK.....	14
Figura 3.1: Modelo de TASK-2.....	17
Figura 3.2: Pasos en la preparación del sistema.....	18
Figura 3.3: Condiciones periódicas de borde.....	20
Figura 3.4: Distancia de Corte o cutoff.....	21
Figura 3.5: Sistemas sometidos a DM.....	22
Figura 3.6: Sistema representativo usado para los cálculos de PMF con ABF.....	25
Figura 3.7: Restricciones aplicadas en ABF, “collar”.....	26
Figura 3.8: División de la coordenada de reacción en ventanas no solapadas.....	28
Figura 4.1: Simulación del canal de potasio TASK-2.....	31
Figura 4.2: División de la coordenada de reacción en ventanas no solapadas.....	34
Figura 4.3: Interacciones sistema ARN-ARN.....	39
Figura 4.4: Interacciones sistema ARG-ARG.....	40
Figura 4.5: Interacción ARG224-GLY212, sistema TASK-2, ARN-ARG.....	41
Figura 4.6: Radio de Hole para los tres sistemas en estudio.....	43